



Mens agitat molem

Zakład Teorii Fazy Skondensowanej UMCS
Condensed Matter Theory Department

ul. Radziszewskiego 10
20 031 Lublin, POLAND

<http://kft.umcs.lublin.pl/ztf> fax: (+48 (0)81) 537 61 90

Prof. dr hab. Karol Izidor Wysokiński tel.(081)5376236 e.mail: karol@tytan.umcs.lublin.pl

Lublin 14 czerwca 2022 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej **mgr Karola Kawy** pt. „Dynamika wzbudzenia w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem i sprzężeniami dalekiego zasięgu”

Recenzowana praca doktorska została wykonana w Katedrze Fizyki Teoretycznej Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej pod kierunkiem prof. dr. hab. inż. Pawła Machnikowskiego. Napisana jest ona w języku polskim, a główne wyniki zostały opublikowane w dwu artykułach, które ukazały się w bardzo dobrym specjalistycznym czasopiśmie Phys. Rev. B. Rozprawa doktorska liczy 121 stron, zawiera listę 63 publikacji włączając obie wymienione prace własne autora. Układ opiniowanej rozprawy nieco odbiega od najczęściej spotykanego w tego typu dokumentach. Po wprowadzających czytelnika w różne aspekty tematu, wstępnych uwagach zawartych w dwustronicowym fragmencie zatytułowanym „Historia i motywacja”, znajdujemy dwa dalsze krótkie teksty o tytułach „Wprowadzenie” oraz „Cel, treść i struktura pracy”. Dalej w rozprawie znajdujemy 5 rozdziałów, po których pojawia się (znowu nienumerowane) i bardzo skąpe pięciozdaniowe „Podsumowanie”, dalej znajdujemy dwa „Dodatki” zawierające techniczne szczegóły obliczeń. Spisy rysunków i tablic oraz informacja o dorobku naukowym autora poprzedzają bibliografię. Pracę kończą „Podziękowania”.

W kolejnych rozdziałach rozprawy autor wprowadza czytelnika w zagadnienia związane z propagacją zaburzenia pojawiającego się w określonym miejscu i czasie badanego układu. Badane są nieuporządkowane układy sieciowe jedno- i dwuwymiarowe z dalekozasięgowymi przeskokami lub oddziaływaniami potęgowo malejącymi z odległością. Nieporządek związany jest z losowym charakterem poziomów „atomowych” na węzle. Taki rodzaj nieporządku jest określane zwykle jako nieporządek diagonalny. Ważną cechą pracy są obszernie analityczne obliczenia różnych charakterystyk zależnych od czasu oraz ich porównanie z obliczeniami numerycznymi. Rozprawa doktorska mgr Karola Kawy wpisuje się w potężny nurt badań nieuporządkowanych ciał stałych i opisu zjawisk lokalizacji nośników. Co ciekawe i godne podkreślenia mimo ponad 60 letniej historii tej tematyki badawczej, której początek umownie stanowi pojawienie się w 1958 roku pracy Andersona o braku dyfuzji spinu w nieuporządkowanych sieciach (Absence of diffusion in certain random lattices), cytowanej ponad 9000 razy, recenzowana rozprawa zawiera kilka oryginalnych wyników teoretycznych. Bardzo dobrze to świadczy o jej wysokim poziomie naukowym. Bezpośrednią i główną mo-

tywacją prowadzonych przez mgr. Karola Kawę badań wydają się wyniki doświadczalne propagacji ekscytonu pomiędzy odległymi kropkami kwantowymi i wcześniejsze badania tego zjawiska przez promotora – prof. Machnikowskiego ze współpracownikami. W szczególnym zrozumieniu zjawiska propagacji ekscytonu oprócz prac promotora oraz Andersona z 1958 roku, ważną rolę odegrała także praca [6] bibliografii (A. Rodriguez i inni, Phys. Rev. Lett. 90, 027404 (2003)) stwierdzająca, że jeśli przeskoki pomiędzy węzłami sieci są dalekozasięgowe to nawet w układzie jednowymiarowym mogą pojawić się stany rozciągnięte. Wcześniejsze badania modeli z przeskokami tylko do najbliższych sąsiadów wyraźnie sugerowały izolatorowy charakter takiego układu. Wspomniana praca [6] przewidywała też istnienie (już nie tak bardzo nieoczekiwanego) przejścia izolator-metal w układzie dwuwymiarowym. Doktorant twórczo rozwija idee zawarte w pracach Andersona oraz Rodrigueza i innych.

Zanim przejdę do omówienia treści poszczególnych fragmentów pracy doktorskiej i całościowej oceny merytorycznej, pokrótce i krytycznie omówię jej stronę edytorską. Układ treści jest logiczny, a praca napisana jest przejrzysto, zasadniczo poprawną polszczyzną. Rzecz jasna autor nie ustrzegł się drobnych literówek, paru niegramatycznych zdań, kilku błędnych odnośników do wzorów i rysunków, z których kilka wymieniam poniżej. Najbardziej jednak razi żargonowe używanie pewnych słów i zwrotów. Słowo „siła” ma w języku potocznym różne znaczenia, natomiast w fizyce jest ono jednoznaczne i powinno być właściwie używane. Stwierdzenia typu „*funkcje siły nieporządku*” użyte już w streszczeniu, „*wartości siły nieporządku*” (np. podpis do rys 1.3, itp.) powtarzają się przez całą rozprawę. Lepiej byłoby je zastąpić zwrotem *natężenie nieporządku* (lub *wielkość nieporządku*). Niepoprawne jest stwierdzenie ze strony 29 (rozdział 2.2) „*stany własne wektora falowego*”. Wektor falo- wy nie jest operatorem tylko liczbą kwantową opisującą stany własne operatora energii kinetycznej lub/i operatora pędu cząstki swobodnej. Wydaje się, że zaobserwowane w obliczeniach analitycznych i potwierdzone w symulacjach 3 różne zależności czasowe średniego kwadratu na różnych etapach dyfuzji określane ogólnie mianem *dyfuzji trójfazowej* lub *dynamiki potrójnej* zgrabniej byłoby nazwać dyfuzją trój etapową lub trójstopniową. Nie ma tam bowiem różnych faz w fizycznym znaczeniu tego słowa. Nic się też nie potraja. Także określenie „*macierz rozpraszania*” dla niediagonalnych w bazie wektora falowego losowych elementów hamiltonianu we wzorze (2.12) jest niezbyt szczęśliwe. Pojęcie to w standardowej i poprawnej wersji, ale w zupełnie innym znaczeniu pojawia się w rozprawie wcześniej (wzór (1.5) na str. 15). Czytając bardzo uważnie tę interesującą pracę znalazłem też kilka niezbyt jasno sformułowanych zdań. Np. w paragrafie poniżej wzoru (2.102) na str. 47 czytamy „*Ostatecznie, gdy funkcja jest na tyle wąska, jej wierzchołek wchodzi w obszar przerwy znajdującej się w środku rozkładu $f_r(u)$ (zob. rys. 2.3(c) lub rys. 2.3(c))*”. Jest tu też błędne dwukrotne odniesienie do tego samego rysunku. W kilku innych miejscach miałem trudności ze stwierdzeniem czy odnośniki są poprawne: przykładowo w ostatnim zdaniu na stronie 58 autor odsyła czytelnika do Rys. 3.7, a wydaje się, że omawia wyniki zilustrowane na rysunku 3.8 (?). Czytelnikowi bardzo utrudnia życie zamieszczenie wzoru (2.6') na początku rozdziału 4, czy np. wzoru (2.106') w części (4.4.C) tegoż rozdziału. Logika nakazuje poszukiwanie tych wzorów w rozdziale 2. Zupełnie błędna jest argumentacja w zdaniu pomiędzy wzorami (A.4) i (A.5) w dodatku A na str. 101 rozprawy. Wartość fazy $\exp(-i(E_n - E_m) t)$ nigdy (niezależnie czy czasy są krótkie czy długie) nie staje się deltą Kroneckera. To suma po obu wskaźnikach (m,n) zni-

ka gdy $E_n \neq E_m$ i dlatego ostateczny wynik jest poprawny. Wreszcie, to chyba chochlik drukarski sprawił, że jedna z pozycji w bibliografii ([30]) zaanonsowana na stronie 22 rozprawy wprowadzeniem „*I tak autorzy pracy [30] ...*” akurat nie zawiera listy autorów, a jedynie tytuł i adres bibliograficzny.

Rozdział 1 omawianej rozprawy doktorskiej zatytułowany „*Lokalizacja Andersona*” zawiera bardzo dobry opis znanych z literatury i szeroko stosowanych metod badania zjawiska lokalizacji stanów elektronowych w układach z nieporządkiem. Dodatkowo na rysunkach (1.3) i (1.4) zilustrowano podstawowe właściwości jednowymiarowego modelu Andersona (z przeskokami do najbliższych sąsiadów) dla układu czystego i nieuporządkowanego. Widać zmiany gęstości stanów oraz zlokalizowany charakter stanów elektronowych dla trzech wybranych wartości energii.

W rozdziałach 2 -5 pracy znajdujemy opis oryginalnych wyników autora uzyskanych dla różnych interesujących go sytuacji fizycznych. Wyniki te są przedstawione po wcześniejszym omówieniu i wyprowadzeniu prostszych lub mniej ogólnych rezultatów innych autorów. W ten sposób czytelnik może łatwo wyobrazić sobie wkład autora i ocenić stopień trudności oryginalnych obliczeń. Rozdział 2 pt. „*Model Andersona z całą przeskoku malejącą potęgowo z odległością*” to opis modelu, który w zasadzie jest tożsamy z modelem rozważanym przez Rodrigueza i współautorów. W rozprawie jest on jednak przedstawiony bardziej szczegółowo, a obliczenia wydają się być nieco ogólniejsze niż w oryginalnych publikacjach. Podano też dość szczegółowo wyprowadzenia najważniejszych wzorów. Autor wykazał się dobrą znajomością literatury przedmiotu oraz elementów teorii prawdopodobieństwa. Czytelnik zostaje tu zaznajomiony z technikami stosowanymi oryginalnie przez Andersona, rozszerzonymi na układy o dowolnym wymiarze przestrzennym d . Ważnym uzupełnieniem analizy Andersona są obliczenia czasowych zależności w procesie propagacji kwazicząstki (elektronu, ekscytynu) lub zaburzenia (wzbudzenie spinu). Autor zauważył, że poprawne wyniki można uzyskać w sposób istotnie prostszy niż w oryginalnych pracach. To spostrzeżenie doprowadziło go do sformułowania uproszczonego opisu nazwanego „model centralnego atomu”. W modelu tym zaniedbuje się wszystkie wielokrotne rozproszenia kwazicząstki z wyjątkiem rozprożeń na tylko jednym z węzłów sieci (ale różnym od węzła centralnego). Model taki (nieoczekiwanie) okazuje się prowadzić tam, gdzie możliwe było porównanie, do wyników zgodnych z wcześniejszymi obliczeniami. Co więcej autor pokazuje, że w pewnych warunkach dynamikę problemu da się zrozumieć korzystając z modelu tylko dwóch atomów, co jest mniej zaskakujące, gdyż już model atomu centralnego efektywnie rozważa tylko dwa węzły. Uzyskanie analitycznych formuł wymagało różnorodnych przybliżeń i uproszczeń. Są one dobrze uzasadnione, wyraźnie opisane i prowadzą do wyników zgodnych z obliczeniami numerycznymi. Świadczy to o dobrym zrozumieniu zagadnienia przez autora rozprawy. Oryginalne wyniki pierwszego rozdziału zostały opublikowane w pracy, która kilka tygodni temu ukazała się w Phys. Rev. B. Z dużym zainteresowaniem przeczytałem ostatni fragment tego rozdziału, gdzie autor omawia granice stosowalności modelu centralnego atomu i stwierdza, że model centralnego atomu jest słuszny tylko dla silnego nieporządku.

Wydaje się, że wynik ten fizycznie można zrozumieć w następujący sposób. Gdy nieporządek jest silny, czyli szerokość rozkładu parametrów losowych jest duża to w układzie (z prawdopodobieństwem bliskim jedności) znajduje się tylko jeden atom różny od centralnego,

ale o losowej wartości energii bliskiej centralnemu. Wtedy przybliżenie to jest słuszne. W przeciwnym przypadku wiele atomów „rezonuje” z centralnym i przybliżenie się załamuje. Chyba to rozumowanie jest równoważne z przedstawionym w ostatnich dwu zdaniach na stronie 49. Poproszę o komentarz w trakcie publicznej obrony.

Bardzo ważnym oryginalnym wynikiem tego rozdziału i całej rozprawy jest stwierdzenie trój etapowego charakteru rozprzestrzeniania się wzbudzenia w nieuporządkowanym układzie, z przeskokami wykładniczo malejącymi z odległością pomiędzy węzłami. Szczegóły zależne są od wartości wykładnika, wymiaru przestrzennego układu i charakteru rozkładu prawdopodobieństwa losowych poziomów atomowych. Autor rozważa dwa rozkłady prawdopodobieństwa: rozkład Gaussa o szerokości σ i rozkład prostokątny o szerokości W . Ciekaw jestem czy model centralnego atomu można zastosować do opisu nieuporządkowanych stopów (np. dwuskładnikowych typu A_xB_{1-x}), dla których funkcja rozkładu charakteryzuje się dwoma ostrymi maksimumami $P(\varepsilon) = x\delta(\varepsilon - \varepsilon_A) + (1-x)\delta(\varepsilon - \varepsilon_B)$. Jakich wyników (np. dla średniego przemieszczenia kwadratowego) należy oczekiwać dla takiego rozkładu?

Kolejny, trzeci rozdział pracy zatytułowany „*Dyfuzja cząstki w układzie z nieporządkiem i sprzężeniami dalekiego zasięgu*” zawiera wyniki symulacji numerycznych dla modelu z poprzedniego rozdziału. Wyniki uzyskano za pomocą ściślejszej diagonalizacji Hamiltonianu dla układu jednowymiarowego w postaci łańcucha o długości $2R$ i dla swobodnych warunków brzegowych oraz dla struktury dwuwymiarowej w postaci koła o średnicy $2R$. W obu przypadkach atomy są rozłożone periodycznie z okresem a przyjętym jako jednostka długości (dla $d=2$ jest to sieć kwadratowa). Obliczenia numeryczne znakomicie odtwarzają analityczne wyniki uzyskane poprzednio. W tym rozdziale autor skupia się na obliczaniu średniego przemieszczenia kwadratowego wzbudzenia, $r_s^2(t)$, w zależności od wielkości nieporządku scharakteryzowanego jego szerokością σ i od liczby N atomów w układzie. Wielkość $r_s^2(t)$ wykazuje trzy różne zależności od czasu. Najpierw jest to zachowanie proporcjonalne do kwadratu czasu. Dla tego obszaru obliczana jest prędkość (v) kwazicząstki w ruchu balistycznym. W późniejszych czasach pojawia się standardowa dyfuzja z $r_s^2(t) \sim t$. Tu istotnym parametrem jest współczynnik dyfuzji D . Zachowanie obu tych parametrów (v i D) jest podobne dla układów jedno- i dwuwymiarowych, choć odpowiednie zależności są scharakteryzowane przez inne potęgi. W ostatnim etapie dynamiki średnie przemieszczenie kwadratowe osiąga stan nasycenia $r_{\text{sat}}^2(t)$. Znalaziono, że wielkość ta skaluje się z liczbą atomów jak N^2 dla łańcucha i jak $N^{3/2}$ dla układu dwuwymiarowego. Wyniki numeryczne pozostają w zgodzie z modelem atomu centralnego. Dla niewielkiej szerokości rozkładu nieporządku (granica słabego nieporządku) obserwuje się spore odstępstwa wyników numerycznych od przewidywań prostego modelu.

Rysunek 3.6 w tym rozdziale przedstawia zależność zasięgu dyfuzji, czyli $r_s^2(t) = r_{\text{sat}}^2$ od odwrotności $1/\sigma$ szerokości rozkładu gaussowskiego nieporządku dla obu badanych układów ($d=1,2$). Pokazano na nim też zależności uzyskane w ramach modelu centralnego atomu. W istotnych obszarach (bardzo silnego i słabego nieporządku) obserwuje się bardzo dobrą zgodność z analitycznymi przewidywaniami dla modelu centralnego atomu. Jednak obliczona numerycznie zależność r_{sat}^2 od $1/\sigma$ wykazuje niemonotoniczne zachowanie i głębokie minimum dla pośrednich wartości szerokości rozkładu. Minimum takie występuje zarówno dla modelu jedno- jak i dwuwymiarowego. Pojawiają się dość oczywiste pytania: skąd bierze się

to minimum w obliczeniach ścisłych? W jaki sposób można takie zachowanie wyjaśnić fizycznie? Jakie procesy prowadzą do tej niemonotonicznej zależności. Jeśli czegoś nie przeczyłem to ani w rozprawie, ani oryginalnej publikacji nie ma żadnej wzmianki objaśniającej takie zachowanie.

W czwartym rozdziale rozprawy zatytułowanym „*Dynamika korelacji w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami*” autor rozważa łańcuch uporządkowanych ferromagnetycznie spinów, w którym spin środkowy jest w pewnej chwili (sądzę, że dla $t=0$, choć nie jest to wyraźnie zaznaczone) obrócony (quantum quench). Nawiązując do problemu prędkości rozchodzenia się informacji doktorant rozważa przestrzenne korelacje dwu odległych spinów i bada zależność tych korelacji od czasu. Podobnie jak dla poprzednich modeli, także w tym przypadku obserwowane są te same co wcześniej trzy różne rodzaje zachowania funkcji korelacji w zależności od czasu (zależność balistyczna, dyfuzyjna i wysycenie) ale tylko dla odwrotnej zależności zaniku oddziaływań od odległości. Jeśli potęga jest różna od jedności to obserwuje się bardziej złożone zależności od czasu co pokazuje rysunek 4.2 rozprawy. Zamiar określenia stożka świetlnego (który w fizyce relatywistycznej odgrywa tak ważną rolę) okazał się dość trudny. Niemniej jednak na rysunku 4.2 pokazano obszar stożka świetlnego na płaszczyźnie czas – odległość pomiędzy skorelowanymi spinami dla kilku bardzo małych wartości liczbowych korelacji.

Rozprawę kończy rozdział 5 pt. „*Dyfuzja ekscytonu w dwuwymiarowym zespole kropek kwantowych*” odbiegający od poprzednich precyzją opisu. Po krótkim omówieniu specyfiki realistycznych układów kropek kwantowych wzbudzanych optycznie, mechanizmów transportu ekscytonu pojawiającego się na jednej z kropek do innej kropki, autor zauważa, że oddziaływanie pomiędzy kropką wzbudzoną, a pozostałymi kropkami kwantowymi na powierzchni próbki jest oddziaływaniem dalekiego zasięgu poprzez elektromagnetyczny rezerwuuar. Oddziaływanie to ma kilka składowych o różnych potęgach r w mianowniku (równych 1,2 lub 3). Wszystkie składowe dodatkowo oscylują w funkcji parametru $(k_0 r)$, gdzie k_0 jest wektorem falowym promieniowania, a r odległością od atomu wzbudzonego. Obliczenia numeryczne wykorzystujące zaawansowany aparat macierzy gęstości i uwzględniające skończony czas życia ekscytonu prowadzą do jego trój etapowej dyfuzji jak to już omawiano wcześniej. Także tutaj wyniki numeryczne potwierdzają przewidywania teoretyczne dla nieco uogólnionego modelu. Zgodność (nawet jeśli jest ona tylko jakościowa) jest mocnym argumentem za słusznością zaproponowanego modelu. Konieczne uogólnienie modelu uwzględnia skończony czas życia ekscytonu. Należy też dodać, że w pełnej teorii należy uwzględnić wiele ekscytonów w układzie. Z drugiej strony złożoność obliczeń szybko wzrasta ze wzrostem liczby ekscytonów ze względu na wzrost rozmiaru przestrzeni Hilberta układu wielocząstkowego. Z opisu obliczeń nie jest dla mnie oczywiste czy były one wykonane dla jednego czy też dla wielu ekscytonów. Jeśli, jak sądzę, obliczenia wykonano dla propagacji jednego ekscytonu, to ciekaw jestem jakich zmian uzyskanych wyników oczekuje autor dla kilku ekscytonów w układzie? Obliczenia numeryczne zaprezentowane w tym rozdziale wykonane zostały metodą tzw. skoków kwantowych omówioną w części 5.3 rozprawy. W obliczeniach analitycznych tego rozdziału autor ograniczył się do jednego oscylującego oddziaływania scharakteryzowanego odwrotną zależnością od odległości. Szkoda, że autor nie poświęcił więcej cza-

su na liczbowe porównanie uzyskanych tu wyników z doświadczeniem. Nie wiem czy takie porównanie jest możliwe, ale z pewnością byłoby korzystne.

Przygotowując rozprawę doktorant zaznajomił się z szeregiem analitycznych i numerycznych technik obliczeniowych. Obejmują one zarówno standardowe aspekty i pojęcia fizyki materii skondensowanej (struktura pasmowa, gęstość stanów, itp.) jak i bardziej złożone (stany rozciągłe i zlokalizowane, granica ruchliwości, przejście metal-izolator, słaba lokalizacja, itd.) W znakomity sposób opanował kilka metod zastosowanych w rozprawie, w tym metody analityczne związane z obliczaniem rozkładów prawdopodobieństw różnych wielkości zależnych od losowych wartości energii atomowych. Z powodzeniem nie tylko przeliczył prace Andersona i Rodrigueza i innych, ale dokonał ich istotnych rozszerzeń. Jego analizy różnych charakterystyk opisujących propagację przestrzenną i czasową wzbudzeń w układach nieuporządkowanych istotnie rozszerzają badania wspomnianych autorów. Duże pozytywne wrażenie robią szczegółowe rozważania autora np. dotyczące subtelnych zmian wynikających z różnych wartości potęg opisujących przestrzenną zależność przeskoków lub oddziaływań. Wykonał on też obliczenia numeryczne, co wymagało nieco innych umiejętności technicznych i znajomości adekwatnych metod numerycznych (ściśła diagonalizacja, skoki kwantowe, itp.). Uzyskano spójny obraz zjawiska lokalizacji w układach z długo zasięgowymi przeskokami na sieci i silnym diagonalnym nieporządkiem. Ogólna teoria, po uwzględnieniu koniecznych efektów, z powodzeniem opisuje realistyczne układy kropek kwantowych losowo rozmieszczonych w przestrzeni i propagację ekscytonu. Biorąc pod rozwagę wciąż utrzymujące się zainteresowanie i coraz większe możliwości doświadczalnego badania łańcuchów atomowych i struktur dwuwymiarowych, jestem przekonany, że niektóre wyniki rozprawy posłużą interpretacji przyszłych doświadczeń.

Reasumując z całym przekonaniem stwierdzam, że recenzowana rozprawa doktorska spełnia wymagania ustawowe i zwyczajowe stawiane takim pracom. Wnoszę zatem o dopuszczenie pana mgr. Karola Kawę do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

K. Grynolowski